

p-22

パイロクロア型Ru酸化物の電子状態

石井史之, 小口多美夫^A 広大院理, 広大院先端^A

e-mail: fumiya@ipc.hiroshima-u.ac.jp

パイロクロア型Ru酸化物 $A_2Ru_2O_7$ は下の図1に示すように RuO_6 の頂点共有の八面体がネットワークを形成する物質群である。この物質群はAカチオンの違いによって多種多様な性質を示す。A=Bi, Pbで金属的であり, A=Y, 希土類で半導体的となる。後者が半導体的になるのは電子相関によるものだと考えられている。そして, A=Tlにおいては, $T=120K$ 近傍で金属-半導体転移を示す。

我々はそのA=Tlについて, 電子状態を明らかにするため, 密度汎関数法における局所密度近似(LDA)の範囲で, FLAPW法によってその電子状態計算を行った。下の図2はその状態密度である。上から全状態密度, Ru, 対称性の異なる2種類のOの部分状態密度を示した。系の物性に寄与するフェルミ準位近傍の電子状態は主にRuのd軌道と酸素のp軌道との反結合軌道からなっている。

一般に簡単なモット絶縁体の描像ではバンド幅に対してクーロン斥力Uが大きくなり, 上部ハバードと下部ハバードにバンド分裂が起きているとされている。我々はモット絶縁体とみられているA=Yと金属であるA=Biの場合についても電子状態計算を行いそのdバンド幅などの比較を行った。本質的にそのバンド幅はAカチオンとの軌道混成の大きさによって異なることが判明した。これらは, ペロブスカイト型酸化物などにはあまり見られない傾向である。

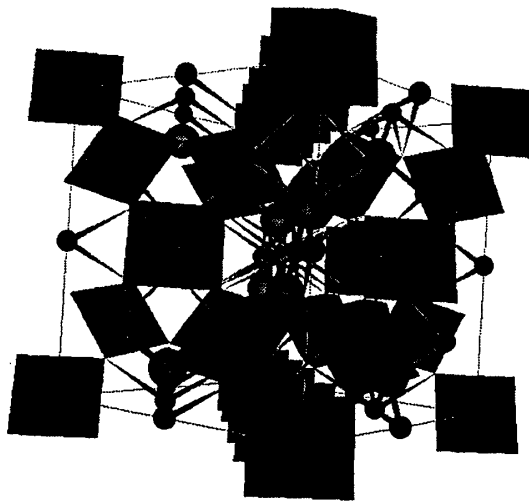


図1 結晶構造

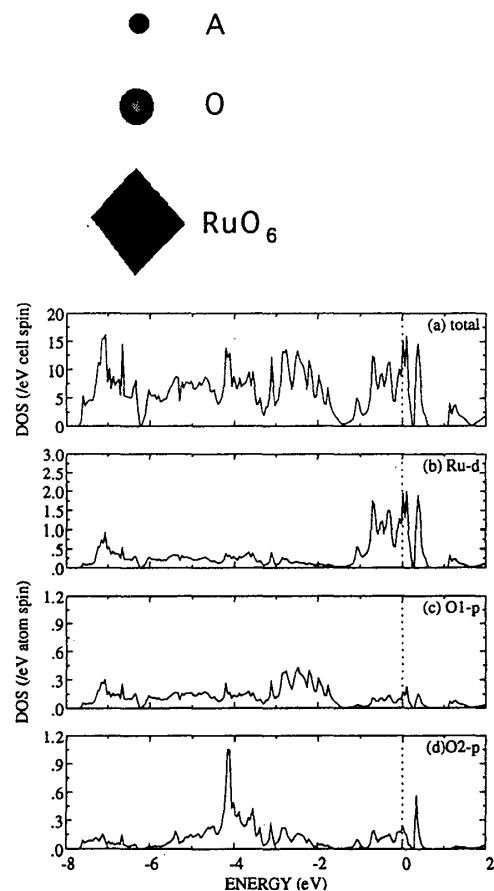


図2 $Tl_2Ru_2O_7$ 状態密度